

企画セッション（核データ部会主催・「シグマ」調査専門委員会共催）
「ミューオン核データの進展」

(4) PHITS のミューオン輸送計算機能とその応用

日本原子力研究開発機構
原子力基礎工学研究センター
放射線挙動解析研究グループ
安部 晋一郎
abe.shinichiro@jaea.go.jp

1. はじめに

近年、ミューオンを活用した研究開発が盛んに行われている。例えば、加速器施設で供給されるミューオンを用いた貴重試料の非破壊元素分析や物質・材料研究、二次宇宙線ミューオンを利用した火山や遺跡などの透視や核物質・禁制品などの検知が挙げられる。一方で、二次宇宙線ミューオンは電子機器の一時的な誤動作（ソフトウェア）を引き起こすため、次世代デバイスの信頼性問題の一因となることが懸念されている。

放射線挙動解析コード PHITS（Particle and Heavy Ion Transport code System）[1]は、あらゆる物質中での様々な放射線の挙動を模擬するモンテカルロ計算コードで、加速器施設や放射線治療施設の遮蔽設計、医療や放射線防護に係る研究、宇宙線挙動解析など、幅広い分野で利用されている。放射線の挙動を精度よく再現するには核反応モデルや核データの精度が重要となるため、PHITS 開発チームではモデルの改良や新規モデルの開発に努めている。

PHITS にはミューオンと物質との相互作用（制動放射、電子・陽電子対生成、ミューオン光核反応、負ミューオン原子・原子核捕獲反応）の計算モデル[2]が搭載されている。しかし、負ミューオン原子核捕獲反応からの二次粒子生成について、PHITS は実験値を過小評価する課題があった。ミューオン起因ソフトウェアは、負ミューオン原子核捕獲反応により生成される陽子やアルファ粒子が主因となるため、二次粒子生成の過小評価はミューオン起因ソフトウェアシミュレーションに影響を及ぼす恐れがある。そこで著者は負ミューオン原子核捕獲反応モデルの改良に取り組んだ。

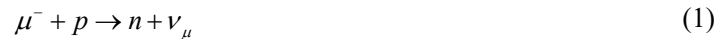
本稿では、モデル改良の概要と、改良したモデルをソフトウェアシミュレーションに応用した結果について述べる。

2. PHITS の負ミューオン原子核捕獲反応モデルの概要

負ミューオンは電子と同じ負電荷のレプトンであるため、エネルギーを減少させながら物質中を移動した後に、原子核のクーロン場に捕らわれて電子の代わりに原子軌道を周回する。原子軌道上のミューオンは、オーグジュ電子や特性 X 線の放出過程を経て準位の低い軌道へと遷移していく。PHITS では、この軌道上のミューオンの遷移過程を Akylas らの開発した Muonic Atom Cascade Program[3]で計算する。

負ミューオンの質量は電子のおよそ 207 倍のため、ミューオン軌道半径は電子軌道半径の 200 倍短い。基底状態である 1s 軌道まで遷移した負ミューオンは原子核近傍を周回するため、軌道上で崩壊する以外にも、原子核に捕獲される可能性がある。また原子番号が大きい原子核ほど、ミューオン 1s 軌道半径が小さくなるため、原子核に捕獲される確率は高くなる。PHITS では、真空中での崩壊率に Huff Factor [4, 5]を乗じて原子軌道上での崩壊率を算出する。捕獲率は、測定値[4]のあるものはその値を採用し、測定値のないものについては Goulard-Primakoff の式[6]を用いる。算出した崩壊率および捕獲率に基づき、1s 軌道上の負ミューオンがどちらの反応へと向かうかを乱数で決定する。

負ミューオンの原子核捕獲反応の素過程は以下のように表現される。



この反応により、反応前後の質量差であるおよそ 100 MeV のエネルギーが反応後の粒子に分配される。その後、エネルギーを得た中性子は原子核中の核子と相互作用し、その結果として二次粒子が放出される。PHITS の負ミューオン原子核捕獲反応モデルでは、反応後の中性子が得るエネルギーを Amado[7]による核内核子の運動量分布と Singer[8]により提示された励起関数に基づいてサンプリングする。続いて、負ミューオンを捕獲する陽子を原子核内からランダムに選択して中性子に変換し、原子核中の核子間の相互作用の時間発展を JQMD (JAERI Quantum Molecular Dynamics) モデル[9, 10]、その後の蒸発過程を GEM (Generalized Evaporation Model) [11]でそれぞれ計算する。

3. 負ミューオン原子核捕獲反応モデルの改良

負ミューオン原子核捕獲反応モデルの改良として、本研究でははじめに JQMD モデルに表面合体モデル (Surface Coalescence Model, SCM) [12]を導入した。先行研究[12]において、核子入射原子核反応からの軽複合粒子 (重陽子、三重陽子、³He イオン、アルファ粒子) 生成に関する JQMD モデルの過小評価を、SCM を導入することで改善したことが報告されている。負ミューオン原子核捕獲反応は、前述したように「エネルギーを得た中性子による原子核反応」と捉えられるため、SCM モデルの導入により負ミューオン原子核捕獲反応からの軽複合粒子生成の過小評価を改善することが期待できる。

次に、負ミューオン原子核捕獲反応に関する励起関数の改良を行った。先行研究[13]にて、陽子が負ミューオンを捕獲する際に他の核子と相互作用 (メソン交換流、Meson

Exchange Current, MEC) することで、式(1)で示した素過程よりも高いエネルギーの励起状態が生じ、その結果として高エネルギー粒子放出の記述が改善されることが報告されている。そこで、図1に示すように、MECの影響を再現したガウス分布関数をこれまで用いていた励起関数に加算した。MEC成分の平均励起エネルギーと全体に占める割合に関しては、先行研究[13]の表1に示された標的原子核にはその値を用い、それ以外の標的原子核にはその値を原子番号について内挿あるいは外挿して算出することとした。

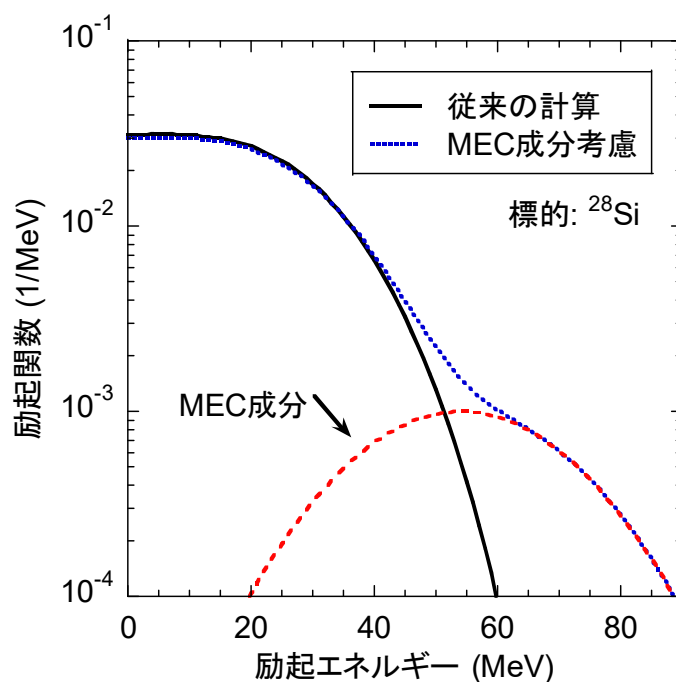


図1 負ミューオン原子核捕獲反応に関する励起関数

改良したモデルの精度検証を行うために、シリコン標的に関する負ミューオン原子捕獲反応について、従来のモデルを用いた計算、SCMを適用した計算、SCMを適用した上でMEC成分を考慮した計算をそれぞれ行い、軽粒子（中性子、陽子、重陽子、三重陽子、アルファ粒子）の放出エネルギー分布に関する実験値[14-18]との比較を行った。なお、SCMのモデルパラメータは中性子入射反応からの二次粒子生成について最適な結果となる値を用いた。図2に比較結果を示す。まず、SCMを適用することで軽複合粒子生成、特に重陽子と三重陽子の過小評価が改善された。これは、従来のモデルを用いた計算で核子生成と判定されるイベントの一部が軽複合粒子生成イベントと判定されたためである。代わりに核子生成イベントは若干減少するが、核子生成断面積は軽複合粒子生成断面積よりも1桁以上高いため、その影響はほとんどない。次に、励起関数にMEC成分を考慮することで、高エネルギーの軽粒子放出の過小評価が改善された。

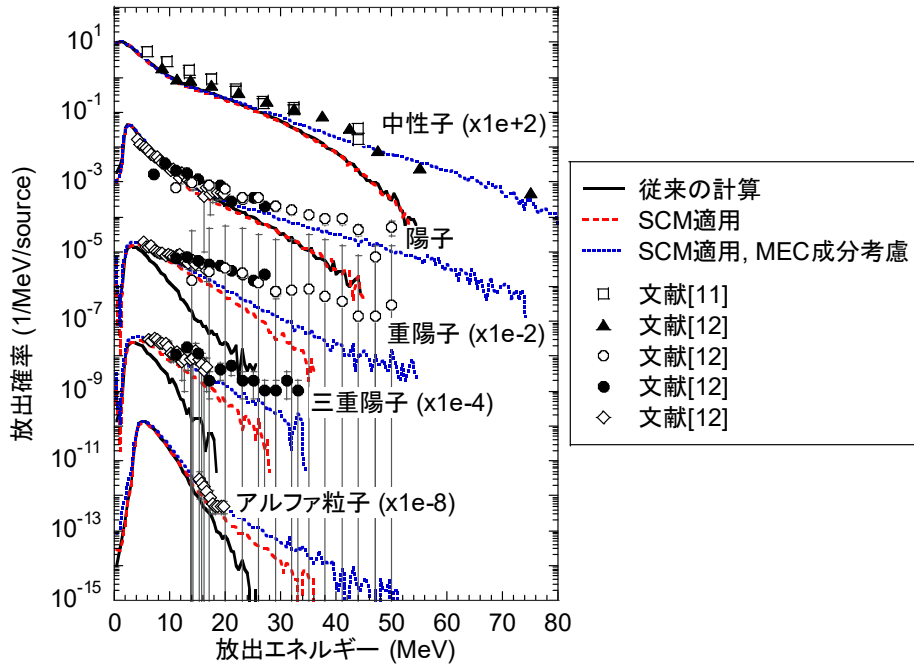


図 2 シリコン標的による負ミューオン原子核捕獲反応で生成される軽粒子のエネルギー分布に関する従来モデルおよび改良モデルの精度検証結果

4. ソフトエラーシミュレーションへの応用

電子機器に搭載される半導体メモリ素子に放射線が入射したとき、ある確率でメモリに保存されている情報が反転 (Single Event Upset, SEU) し、その結果としてソフトエラーが生じる。地上でのソフトエラーの主因は二次宇宙線中性子であるが、近年の半導体デバイスの微細化・高集積化に伴い二次宇宙線ミューオン起因ソフトエラーの顕在化も懸念されている。図 3 に SEU 発生過程の模式図を示す。核反応で生じた荷電粒子が半導体デバイス内を通過する際に電荷が付与され、その電荷の一部が情報を保持する電極 (記憶ノード) に収集されることで SEU が生じる。半導体デバイスに入射したミューオンが直接電荷を付与して SEU を起こすこともあるが、これまでの研究でミューオン起因ソフトエラーの主因は負ミューオン原子核捕獲反応から生成される陽子やアルファ粒子であることが明らかになっている[19]。

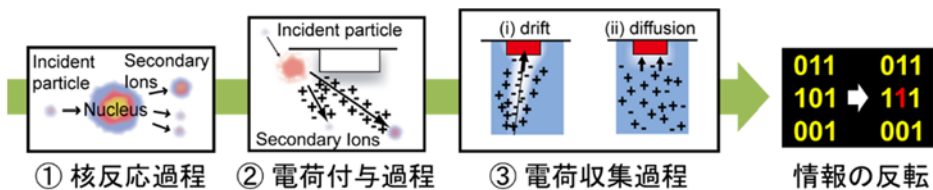


図 3 SEU 発生過程の模式図

1章でも述べたように、負ミューオン原子核捕獲反応による二次荷電粒子生成の過小評価は、ミューオン起因ソフトエラーシミュレーションに影響を及ぼす恐れがある。そこで、負ミューオン原子核捕獲反応の改良がソフトエラーシミュレーションへ及ぼす影響を明らかにするために、設計ルール（半導体の製造技術の世代を表す指標）65nmのBulk SRAMへの負ミューオン照射について、従来のモデルを用いた計算、SCMを適用した上でMEC成分を考慮した計算をそれぞれ行い、SEUイベント断面積（1つの放射線によってSEUが起こる確率）を算出した。図4に計算体系を示す。メモリアレイに付与された電荷のうち、どの程度の電荷が記憶ノードに収集されるかについては、これまでの研究で構築した設計ルール65nm Bulk SRAMに関する多重有感領域モデル[20]を用いて算出した。負ミューオンは試験ボードのプリント基板側から照射し、初期運動量はミューオンがメモリアレイの手前で停止する35.6 MeV/cと、メモリアレイ内で停止する36.4 MeV/cの2条件について計算を行った。

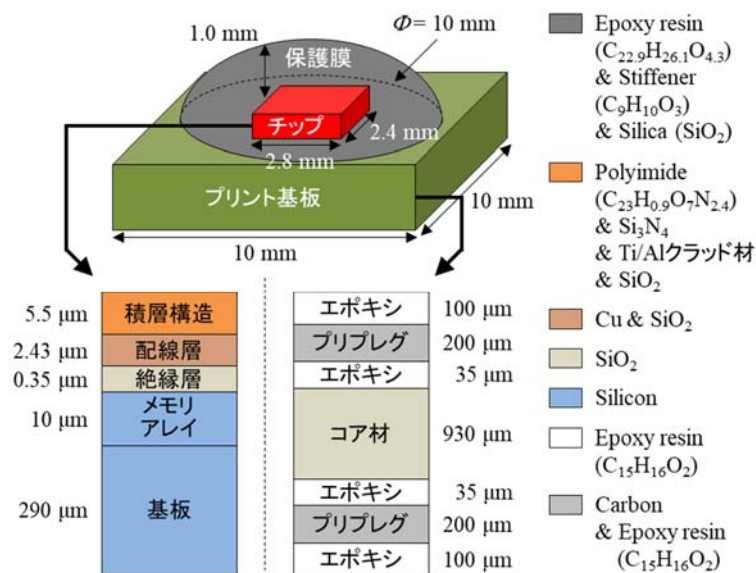


図4 計算体系の模式図

図5に、それぞれの条件で算出したSEUイベント断面積と、荷電粒子種ごとの寄与を示す。ここでしきい電荷量とは、SEUイベントが発生するために必要な収集電荷量を意味する。おおよその目安として、設計ルール65nmのbulk SRAMのしきい電荷量は、通常の動作電圧では1fC程度[21]である。負ミューオンがメモリアレイ手前で停止する照射条件の場合、モデルの改良によって主に陽子および重陽子の寄与が増加したことで、SEUイベント断面積が10~50%程度増加した。これは、モデルの改良によって高エネルギーの軽荷電粒子放出が改善されたため、より多くの軽荷電粒子がメモリアレイに到達するようになったことに起因する。モデルの改良によって三重陽子生成の過小評価も改善さ

れたが、元々の放出確率が陽子や重陽子と比べて低いため、SEU イベントの発生にはほとんど寄与しないこともわかった。しかし、現状の改良モデルは高エネルギー重陽子放出の過小評価を完全には解消できていないため、更なるモデルの改良によって SEU イベント断面積が現状よりも多少増加することが予想される。一方、負ミューオンがメモリアレイ内で停止する照射条件の場合、モデルの改良前後で SEU イベント断面積はほとんど変化しなかった。これは、負ミューオンがメモリアレイ内で停止する場合の SEU イベントの主因は反跳原子核 (図 5 中のその他に分類) であり、モデル改良によって放出の増えた高エネルギー軽荷電粒子は初期の線エネルギー付与 (LET) が低いため付与電荷量が少なく、SEU イベント発生にはあまり寄与しないことが原因である。

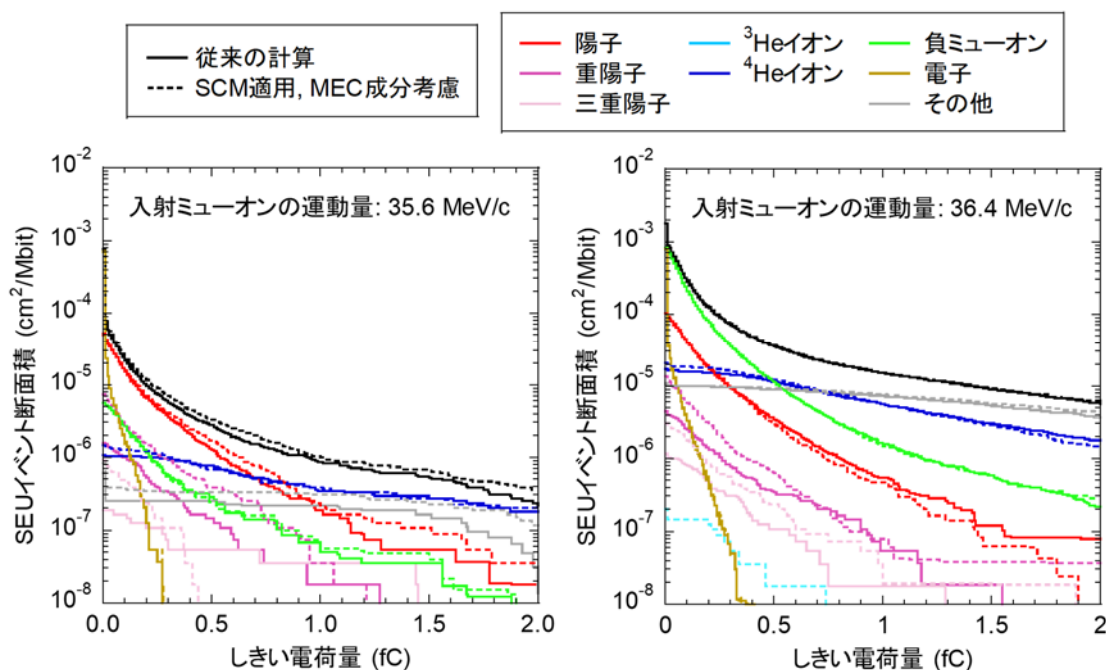


図 5 従来モデルおよび改良モデルで算出した負ミューオン起因 SEU イベント断面積

5. まとめ

本稿では、PHITS の負ミューオン原子核捕獲反応モデルの改良について記した。JQMD モデルに SCM を導入することで軽複合粒子の放出の過小評価を、励起関数に MEC 成分を考慮することで高エネルギー軽粒子放出の過小評価をそれぞれ改善することができた。また改良したモデルをソフトエラーシミュレーションへ応用した結果、モデルの改良によって高エネルギー軽荷電粒子放出が増加することで、メモリアレイ周辺で負ミューオンが停止するような条件では SEU イベント断面積が 10~50%程度増加することが判明した。しかし、現状の改良モデルは高エネルギー重陽子放出を依然過小評価しているため、これを改善することで SEU イベント断面積が若干増加することが予想される。

謝辞

本研究は、JSPS 科研費 JP19H05664 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] T. Sato et al., "Recent improvements of the Particle and Heavy Ion Transport code System - PHITS version 3.33," *J. Nucl. Sic. Technol.*, vol. 61, p. 127 (2024).
- [2] S. Abe and T. Sato, "Implementation of muon interaction models in PHITS," *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol. 54, p. 101 (2017).
- [3] V. R. Akylas and P. Vogel, "Muonic atom cascade program," *Comput. Phys. Commun.*, vol. 15, pp. 291-302 (1987).
- [4] T. Suzuki and D. F. Measday, "Total nuclear capture rates for negative muons," *Phys. Rev. C*, vol. 35, pp. 2212-2224 (1987).
- [5] M. V. Kossov, "Chiral invariant phase space event generator," *Eur. Phys. J. A*, vol. 33, pp. 7-10 (2007).
- [6] B. Goulard and H. Primakoff, "Nuclear muon-capture sum rules and mean nuclear excitation energies," *Phys. Rev. C*, vol. 10, pp. 2034-2044 (1974).
- [7] R. D. Amado, "Momentum distributions in the nucleus," *Phys. Rev. C*, vol. 14, pp. 1264-1270 (1976).
- [8] P. Singer, "Neutron Emission Following Muon Capture in Heavy Nuclei," *Il Nuovo Cimento*, vol. 23, pp. 669-689 (1962).
- [9] K. Niita et al., "Analysis of the (N, xN') reactions by quantum molecular dynamics plus statistical decay model," *Phys. Rev. C*, vol. 52, p. 2620 (1995).
- [10] T. Ogawa et al., "Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic ^{12}C ," *Phys. Rev. C*, vol. 92, 024614 (2015).
- [11] S. Furihata, "Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions," *Nucl. Instr. Meth. B*, vol. 171, p. 251 (2000).
- [12] Y. Watanabe and D. N. Kadrev, "Extension of quantum molecular dynamics for production of light complex particles in nucleon-induced reactions," in *Proc. Int Conf Nucl. Data Sci. Technol., EDP Sci.*, p.945 (2008).
- [13] M. Lifshitz and P. Singer, "Meson-Exchange Currents and Energetic Particle Emission from μ -Capture," *Nucl. Phys. A*, vol. 476, pp. 684-700 (1988).
- [14] R. M. Sundelin and R. M. Edelman, "Neutron Asymmetries and Energy Spectra from Muon Capture in Si, S, and Ca," *Phys. Rev. C*, vol. 7, pp. 1037-1060 (1973).
- [15] T. Kozłowski et al., "Energy Spectra and Asymmetries of Neutrons Emitted after Muon Capture," *Nucl. Phys. A*, vol. 436, pp. 717-732 (1985).

- [16] Y. G. Budyashov et al., “Charged Particles from the Capture of Negative Muons by the Nuclei ^{28}Si , ^{32}S , ^{40}Ca and ^{64}Cu ” *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 33, p. 11-15 (1971).
- [17] S. Manabe, “Study of Muon-induced Single Event Upsets in SRAMs and their Fundamental Physical Process,” *Ph. D Thesis, Kyushu Univ.* (2021).
- [18] A. Edmonds et al., “Measurement of proton, deuteron, triton and α particle emission after nuclear muon capture on Al, Si and Ti with the AlCap experiment,” *Phys. Rev. C*, vol.105, 035501 (2022).
- [19] 安部晋一郎、「ミューオン輸送の PHITS シミュレーション」、核データニュース No. 114、pp. 18-27 (2016).
- [20] S. Abe and T. Sato, “Soft error rate analysis based on multiple sensitive volume model using PHITS,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol. 53, pp. 451-458 (2016).
- [21] P. Roche et al, “Comparisons of soft error rate for SRAMs in commercial SOI and bulk below the 130-nm technology node,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 50, pp. 2046-2054 (2003).